

近邻原子的空间排列对非晶态 铁磁体自旋波谱的影响*

王 鼎 盛 蒲 富 恪

(中国科学院物理研究所)

在非晶态铁磁体中,原子的不规则排列和交换作用的无规涨落对自旋波谱都有影响. 理论计算通常把这两种因素分别考虑. 例如, Исхаков^[1] 计算了按简单立方点阵规则地排列但交换作用常数有无规涨落的系统; Alben^[2] 用计算机模拟处理了一个近邻交换作用相等但原子在空间随机排列的系统. 根据中子非弹性散射测量非晶态铁磁体自旋波谱的结果,长波部分的自旋波能量 $E = DK^2$, 这是很自然的结果. Mook 等人^[3]发现非晶态铁磁体 Co_4P 的自旋波谱,在波长甚短时出现一个尖锐的能量极小,这个现象还没有能够从理论上解释^[4]. 本文的分析表明,这个现象可能是由于近邻原子的空间排列和它对自旋波传播方向的影响引起的.

自旋系统的运动方程式为

$$d\mathbf{S}_n/dt = \frac{2}{\hbar} \mathbf{S}_n \times \sum_m J(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m) \mathbf{S}_m.$$

如果只考虑基态 ($S_n^z \equiv S$) 附近的弱激发,时间因子为 $e^{-i\omega t}$, 可令

$$\mathbf{S}_n \approx (u_n e^{-i\omega t}, v_n e^{-i\omega t}, S),$$

则线性化的运动方程为

$$\begin{aligned} (-i\omega)u_n &= \frac{2S}{\hbar} \sum_m J(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)(v_n - v_m); \\ (-i\omega)v_n &= -\frac{2S}{\hbar} \sum_m J(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)(u_n - u_m). \end{aligned} \quad (1)$$

定义原子密度函数

$$P_n(\mathbf{r}) = \sum_{m \neq n} \delta(\mathbf{r}_n + \mathbf{r} - \mathbf{r}_m),$$

表示距离第 n 个原子为 $\mathbf{r}$ 处的原子密度. 用 $P_n(\mathbf{r})$ 可以把方程组 (1) 中的求和改写成积分,如

$$(-i\omega)u_n = \frac{2S}{\hbar} \int d\mathbf{r} J(\mathbf{r}) P_n(\mathbf{r})(v(\mathbf{r}_n) - v(\mathbf{r}_n + \mathbf{r})).$$

若只有近邻相互作用,即

$$J(\mathbf{r}) = \begin{cases} J_0 & r_0 - \frac{1}{2} \Delta r_0 \leq r \leq r_0 + \frac{1}{2} \Delta r_0; \\ 0 & \text{其他,} \end{cases}$$

则方程组 (1) 可改写成只与近邻原子密度的角向分布有关的形式,如

* 1978年6月12日收到.

$$(-i\omega)u(\mathbf{r}_n) = \frac{2S}{\hbar}(4\pi r_0^3)4r_0J_0 \cdot \frac{1}{4\pi} \int d\Omega P_n(\mathbf{r}_0)[v(\mathbf{r}_n) - v(\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_0)]$$

式中 $\int d\Omega$ 指对整个球面积分。定义约化的近邻原子密度角向分布函数 $\rho_n(\mathbf{r}_0) = \rho_n(\mathbf{r}_0)/\langle\rho_n(\mathbf{r}_0)\rangle$ 。其中 $\langle\rho_n(\mathbf{r}_0)\rangle$ 是近邻角向分布的统计平均值,显然它应与 n 无关,即 $\langle\rho_n(\mathbf{r}_0)\rangle = \rho(r_0)$ 。 $Z = (4\pi r_0^2)\Delta r_0\rho(r_0)$ 是近邻数的平均值。 $\rho_n(\mathbf{r}_0)$ 应满足归一条件 $\langle\rho_n(\mathbf{r}_0)\rangle = 1$ 。采用约化的能量 $\epsilon = \hbar\omega/2SZJ_0$, 方程组 (1) 改写成

$$\begin{aligned} -i\epsilon u(\mathbf{r}_n) &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \rho_n(\mathbf{r}_0)[v(\mathbf{r}_n) - v(\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_0)]; \\ -i\epsilon v(\mathbf{r}_n) &= -\frac{1}{4\pi} \int d\Omega \rho_n(\mathbf{r}_0)[u(\mathbf{r}_n) - u(\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_0)]. \end{aligned} \quad (2)$$

在这组方程中随机函数 $\rho_n(\mathbf{r}_0)$ 破坏了空间平移对称性,不能象晶态铁磁体那样用傅里叶变换得平面波解。利用处理随机微分方程的手段^[5],可以得到近似的结果。作为零级近似,假设统计平均值满足:

$$\langle\epsilon u(\mathbf{r}_n)\rangle = \langle\epsilon\rangle\langle u(\mathbf{r}_n)\rangle; \quad (3.1)$$

$$\langle\rho_n(\mathbf{r}_0)[u(\mathbf{r}_n) - u(\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_0)]\rangle = \langle\rho_n(\mathbf{r}_0)\rangle\langle u(\mathbf{r}_n) - u(\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_0)\rangle, \quad (3.2)$$

以及相似的与 $v(\mathbf{r}_n)$ 有关的公式。显然在这样的近似下,关于 $\langle u(\mathbf{r}_n)\rangle$ 和 $\langle v(\mathbf{r}_n)\rangle$ 的方程恢复了平移对称性。自旋偏离的平均值有平面波解: $\langle u(\mathbf{r}_n)\rangle = u e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n}$ 。自旋波能量的平均值

$$\langle\epsilon\rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega (1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}) = 1 - \sin Kr_0/Kr_0. \quad (4)$$

按照这个结果,能量在长波部分正比于 K^2 ,在 $Kr_0 = 7.75$ 处能量有极小值。这个能量极小的位置与实验相符。对于 Co₂P 样品 $K = 3.1 \text{ \AA}^{-1}$, $r_0 \approx 2.5 \text{ \AA}$, $Kr_0 \approx 7.8$ ^[3]。但是实验上测定的能量极小要尖锐得多,不能用零级近似的结果解释^[4]。文献 [4] 中套用点阵自旋波能量的表达式已经得到与 (4) 式相同的结果(同样结果又见于文献 [6])。本文的这段推导只是为了说明近似究竟在什么地方。

零级近似中最重要的假设是 (3.1) 式与 (3.2) 式。前一个假设比较合理一些,因为 ϵ 是由整个样品的性质决定,不至于会显著地依赖于某一个原子的自旋偏离,所以认为 ϵ 与 $u(\mathbf{r}_n)$ 是统计独立的还说得通。后一个假设认为, $\mathbf{r}_n$ 处自旋偏离的改变与其近邻分布也是统计独立的。这个假设丢掉的东西可能太多:事实上讨论问题中考虑的就是近邻交换作用,近邻原子的分布当然应与该点的自旋偏离变化有关联。我们的办法是用比 (3.2) 式稍进一步的近似,反映出一部分这项关联。

首先假设对于在原子 n 旁的所有近邻自旋改变均满足

$$u(\mathbf{r}_n) - u(\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_0) = u(\mathbf{r}_n)(1 - e^{i\mathbf{k}_n\cdot\mathbf{r}_0});$$

$$v(\mathbf{r}_n) - v(\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_0) = v(\mathbf{r}_n)(1 - e^{i\mathbf{k}_n\cdot\mathbf{r}_0}).$$

一般而言,这个表示并不合理,仅当各点的 $\bar{\mathbf{K}}_n$ 偏离平均波矢 $\mathbf{K} = \langle\mathbf{K}_n\rangle$ 不大时,即 $|\mathbf{K}_n - \mathbf{K}| \ll |\mathbf{K}|$ 且 $|\mathbf{K}_n - \mathbf{K}|r_0 \ll 1$ 时近似地成立。这意味着真正的自旋偏离与平面波相比略有改变:各点的振幅与波矢稍微偏离平均值。

其次,为了考虑近邻原子分布的影响,我们采用局部坐标系:从原子 n 的近邻原子中

找出这样一个原子,它与原子 n 的连线比其他近邻与原子 n 的连线更靠近平均传播方向. 取这个近邻与原子 n 的连线作为局部坐标系的极轴 $\mathbf{Z}_n$. 因此对于不同的原子 n , 局部坐标系的轴 $\mathbf{Z}_n$ 不一样, 分布在平均传播方向附近. $\mathbf{Z}_n$ 与平均传播方向之间的夹角范围 $(0 - \theta^*)$ 大致满足

$$2 \cdot \frac{1}{4\pi} \int_0^{\theta^*} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta = \frac{1}{Z}, \quad \text{即 } \cos \theta^* = 1 - 1/Z.$$

在局部坐标系中, 近邻原子的坐标以 (θ, φ) 表示, 近邻原子密度的角向分布函数 $\rho_n(\mathbf{r}_0)$ 以 $\rho(\theta, \varphi)$ 表示.

代替近似 (3.2) 式, 我们作如下的近似. 认为各点自旋偏离的幅度与近邻分布是统计独立的, 同时自旋波的局部波矢的大小与近邻分布也是统计独立的, 只有自旋波的局部传播方向完全由近邻原子分布决定, 且 $\mathbf{K}_n$ 总保持与 $\mathbf{Z}_n$ 平行. 因此

$$\begin{aligned} \langle \rho_n(\mathbf{r}_0) [u(\mathbf{r}_n) - u(\mathbf{r}_n + \mathbf{r}_0)] \rangle \\ = \langle \rho_n(\theta, \varphi) (1 - e^{i\mathbf{K}_n \mathbf{r}_0 \cos \theta}) u(\mathbf{r}_n) \rangle \\ = \langle \rho_n(\theta, \varphi) \rangle (1 - e^{i\langle \mathbf{K}_n \rangle \mathbf{r}_0 \cos \theta}) \langle u(\mathbf{r}_n) \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

$\langle \rho_n(\theta, \varphi) \rangle$ 是按局部坐标系描写的近邻原子密度分布函数的平均值, 显然它与 n 和 φ 无关, 只与 θ 有关, 与 θ 的关系反映了近邻原子分布的空间关联. 令 $\rho(\theta) = \langle \rho_n(\theta, \varphi) \rangle$, 又令 $K' = \langle K_n \rangle$ (注意, 一般而言 $K' \neq |\mathbf{K}| = |\langle \mathbf{K} \rangle|$). 用 (5) 式代替 (3.2) 式, 得自旋波能量

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\theta \int d\varphi \sin \theta \rho(\theta) (1 - e^{iK' r_0 \cos \theta}). \quad (6)$$

(6) 式比 (4) 式改进之处在于考虑了一部分近邻分布与自旋波之间的关联.

进一步计算应选定具体的 $\rho(\theta)$. 遗憾的是现在还没有实验测定的角向分布, 也没有理论结果可以引用. 因此暂时还只能用一个假定的模型作具体计算. 我们用的模型是

$$\rho(\theta) = 1 + p \cos(2\pi \cos \theta), \quad (7)$$

其中 p 表示分布中空间均匀部分与变化部分的比例. 这个分布满足归一条件

$$\frac{1}{4\pi} \int d\theta \int d\varphi \sin \theta \rho(\theta) = 1.$$

按照局部坐标系的定义, 在 $\theta = 0$ 和 π 时 $\rho(\theta)$ 应取极大值, 而且 $\rho(\theta) = \rho(\pi - \theta)$, (7) 式也满足这个条件. 这个分布的特点是在 $\theta = \pi/3$ 和 $2\pi/3$ 附近取极小值. (7) 式代入 (6) 式后得自旋波能量为

$$\langle \epsilon \rangle = 1 - \frac{\sin K' r_0}{K' r_0} - \frac{1}{2} p \left\{ \frac{\sin(K' r_0 + 2\pi)}{(K' r_0 + 2\pi)} + \frac{\sin(K' r_0 - 2\pi)}{(K' r_0 - 2\pi)} \right\}. \quad (8)$$

前两项正好是零级近似的结果 (4) 式, 最后一项是考虑近邻分布得到的修正项. $p = 0$ 即没有近邻分布改变和 $p = 1$ 即近邻分布变化很显著时的曲线绘于图 1. 可以看到当近邻分布变化显著时, 能量极小值显著地尖锐起来. 能量极小的位置是 $K' r_0 \approx 7.1$. 考虑到 $\mathbf{K}_n$ 是分布在 $\mathbf{K}$ 附近 0 至 θ^* 那样大一个角度范围, 因此, 由 $K'/\langle \cos \theta \rangle \approx K$ 得到

$$K \approx K' / \frac{1}{2} (1 + \cos \theta^*) \approx K' / (1 - 1/2Z).$$

所以能量极小值相应的波矢应满足 $K r_0 \approx 7.1 / (1 - 1/2Z) \approx 7.5$, 与实验结果相符^[3]

(Co_4P 的近邻磁性原子数取为 10)。结果 (8) 式比零级近似改进的地方在于可以解释极小值附近能量改变很陡这个实验结果: 能量极小值处的曲线与 $K=0$ 处几乎完全一致^[3]。图 1 中 $p=1$ 的曲线与此相符。

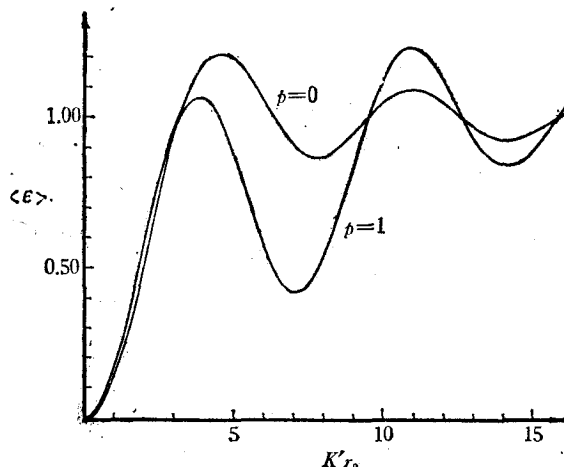


图 1 近邻原子的空间排列对非晶态铁磁体自旋波谱的影响

本文的假设可以归纳为这样一点: 非晶态铁磁体中, 自旋波不再是准确的平面波, 其偏离主要表现在传播方向的局部变化上。这个图象的解释是因为这样传播的自旋波能量比较低。Alben 的计算机模拟中, 虽然用了具有非晶态结构的原子随机排列模型, 但是所用的计算方法中忽视了自旋波方向的局部变化, 因而结果与零级近似大体相同, 不能解释实验现象^[2]。

此外, 本文还用了一个假设的近邻原子密度角向分布模型。对于结果(能量极小值附近能量急剧下降)有决定意义的是分布函数 $\rho(\theta)$ 的极小值在 $\theta = \pi/3$ 和 $2\pi/3$ 附近。进一步的工作中, 我们希望能用更实际一些分布函数, 以检验本文的想法是否正确。

参 考 文 献

- [1] P. C. Исхаков, *Физ. твёрд. тела*, **19**(1977), 3.
- [2] R. Alben, *AIP Conf. Proc.*, **29** (1975), 136.
- [3] H. A. Mook *et al.*, *Phys. Rev. Letters*, **34** (1975), 1029.
- [4] U. Krey, *J. Magnetism and Magn. Materials*, **6** (1977), 27.
- [5] 例如参看 W. E. Boyce, *Probabilistic Methods in Applied Mathematics*, Vol. 1, A. T. Bharucha-Reid (ed.) 1968.
- [6] M. A. Continentino and N. Rivier, *Physica*, **86+88B** (1977), 793.

THE INFLUENCE OF THE SPATIAL ARRANGEMENT OF THE NEIGHBORING ATOMS ON THE SPIN WAVE SPECTRA OF THE AMORPHOUS FERROMAGNETS

WANG DING-SHENG PU FU-CHO
(Institute of Physics, Academia Sinica)